На правах рукописи

Смирнов Александр Владимирович

Комплекс алгоритмов и программ для вычисления фейнмановских интегралов

01.01.07 — вычислительная математика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Москва 2012

Работа выполнена в лаборатории информационных систем математических наук Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Официальные оппоненты:	Белокуров Владимир Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, профессор
	Велижанин Виталий Николаевич, доктор физико-математических наук, ФГБУ Петербургский институт ядерной физики имени Б.П.Константинова, ведущий научный сотрудник
	Фаустов Рудольф Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор Вычислительный центр им.А.А.Дородницына РАН, главный научный сотрудник
Ведущая организация:	Лаборатория информационных технологий Объединенного института ядерных исследований

Защита состоится 26 октября 2012 г. в 15 час. на заседании Диссертационного совета Д 501.002.09 при Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4, МГУ, НИВЦ, Большой конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., 27).

Автореферат разослан “ ” _______ 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Суворов В.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Диссертация представляет собой исследование, относящееся к области вычислительной математики. Она посвящена алгоритмам редукции и вычисления фейнмановских интегралов. Интегралы Фейнмана являются фундаментальными величинами при построении квантово-полевых амплитуд в рамках теории возмущений, в частности, они возникают при вычислениях в рамках Стандартной Модели физики элементарных частиц.

Стандартная Модель успешно применяется в физике элементарных частиц уже около сорока лет. Некоторые ее аспекты, например, свойства Z-бозона, были проверены с точностью, сильно превышающей один процент, — в основном, на Большом Адронном Коллайдере в CERN, линейном коллайдере в SLAC (Stanford) и в Fermilab TEVATRON (Chicago). Никаких сильных расхождений эксперимента с теорией не было выявлено.

Другие части Стандартной Модели, связанные с CP нарушением (относительно зарядового и пространственного отражения) и смешиванием кварков, ожидают новых экспериментальных результатов для получения соответствующих параметров. Предполагается, что текущие эксперименты на Большом Адронном Коллайдере позволят открыть бозон Хиггса и, более того, приведут к одному из обсуждаемых расширений Стандартной Модели. Как только бозон Хиггса будет обнаружен, он сразу станет объектом точных измерений. В частности, на будущем электрон-позитронном коллайдере можно будет изучать его свойства.

В последнее время существенно продвинулись вычисления радиационных поправок. Стоит отметить, что большая часть этих вычислений была инициирована фундаментальными работами Г. т'Хофта и М. Вельтмана в 1972 г., когда размерная регуляризация стала мощным инструментом при вычислении многопетлевых диаграмм. С тех пор возникло целое направление науки, занимающееся вычислением многопетлевых фейнмановских интегралов.

На однопетлевом уровне процедура вычисления систематически изучалась уже достаточно давно. Тем не менее даже на сегодняшний день невозможно совершенно автоматически вычислить произвольную однопетлевую диаграмму, в частности, если она содержит много внешних концов или имеет сложную конфигурацию импульсов. Соответственно, диаграммы, содержащие две или большее количество петель, представляют большую сложность для математики и часто не могут быть вычислены явно. Все же на двухпетлевом уровне определенные классы диаграмм могут быть изучены при помощи комбинации аналитических упрощений и численных методов, как это было сделано в случае двухточечных функций с несколькими ненулевыми массами. Так же могут работать и чисто аналитические методы, как, например, в случае безмассовых диаграмм с четырьмя внешними концами. Но на трехпетлевом уровне систематически удается изучать лишь одномасштабные интегралы, а для четырехпетлевых интегралов ситуация обстоит еще сложнее.

Квантовая хромодинамика (КХД) как теория сильных взаимодействий представляет собой важную часть Стандартной Модели и большинства ее расширений. На низких энергиях константа связи КХД α_s велика, и поэтому вычисления в рамках теории возмущений невозможны. Однако благодаря явлению асимптотической свободы, значение α_s уменьшается при росте энергии, и теория возмущений становится подходящим инструментом для вычисления радиационных поправок.

На данный момент большая часть многопетлевых вычислений производится в рамках квантовой электродинамики (КЭД) или КХД. Такие вычисления проще, чем в полной Стандартной Модели, по той причине, что эти теории зависят от меньшего количества параметров. Более того, имеется строгая иерархия между массами кварков и лептонов, что упрощает вычисления. В случае КЭД имеются точные экспериментальные результаты, требующие также и высокой теоретической точности. Константа взаимодействия в этом случае мала, но многопетлевые вычисления все равно нужны, чтобы теоретические результаты смогли сравниться с экспериментальными (например, в случае аномального магнитного момента электрона). В случае КХД константа взаимодействия больше на порядок. Тем не менее, во многих ситуациях может быть произведено вычисление по теории возмущений. При этом члены высокого порядка оказываются важными и не могут быть отброшены.

Таким образом, еще раз стоит подчеркнуть, что вычисление многопетлевых интегралов Фейнмана было и остается востребованной задачей. С другой стороны, математические задачи, возникающие во время этих вычислений, представляют интерес сами по себе. Развитие техники вычисления фейнмановских интегралов привело к плодотворному междисциплинарному взаимодействию между математиками и физиками. В частности, стоит отметить связь фейнмановских интегралов с такими понятиями современной математики, как периоды, смешанные структуры Ходжа, мотивы, символы, алгебры Хопфа, алгебры трансцендентных чисел и т.д. Также стоит отметить, что многие действия, выполняемые при вычислении фейнмановских интегралов, требуют строгих формулировок и математических обоснований (например, конечность числа мастер-интегралов или же метод областей).

Опишем более подробно, как происходит процесс вычисления фейнмановских интегралов и какие проблемы при этом возникают. При вычислениях в рамках теории возмущений проводится тензорная редукция, после чего каждая фейнмановская диаграмма порождает многочисленные интегралы Фейнмана с одинаковой структурой подынтегрального выражения, но различными степенями пропагаторов. Стандартным подходом является разбиение задачи на редукцию и вычисление так называемых мастер-интегралов. А в случаях, когда этот метод не работает ввиду сложности задачи, применяется асимптотическое разложение фейнмановских интегралов.

Редукция фейнмановских интегралов основывается на изобретенном около тридцати лет тому назад методе интегрирования по частям (Ткачёв, Четыркин, 1981) в применении к фейнмановским интегралам. Суть метода заключается в том, что для фейнмановских интегралов выводятся без вычисления соотношения, которые применяются для сведения интегралов к некоторому ограниченному количеству интегралов, так называемым *мастер-интегралам*. Термин “мастер-интеграл” долге время применялся лишь на интуитивном уровне. Тем не менее на практике соотношения интегрирования по частям использовались успешно в многочисленных работах. Изначально редукция фейнмановских интегралов к мастер-интегралам осуществлялась “вручную”, но для достаточно сложных классов интегралов это стало невозможным.

Было сделано несколько попыток систематизировать процесс редукции. В 2000 г. был сформулирован алгоритм автоматической редукции (так называемый алгоритм Лапорты), а четырьмя годами позже была опубликована его первая реализация `AIR` (на языке `Maple`). Стоит упомянуть, что на данный момент существует довольно много частных реализаций алгоритма Лапорты. Сравнить их производительность между собой весьма сложно — авторы достаточно мощных продуктов обычно не предоставляют свои программы для публичного использования.

Другая активность в этом направлении была связана с использованием базисов Грёбнера. Первый вариант такого подхода был предложен О.В. Тарасовым в 1998 г.; в его работах соотношения интегрирования по частям сводились к дифференциальным уравнениям. Прямое применение некоммутативных базисов Грёбнера было предложено В.П. Гердтом в 2004 г.

Вычисление мастер-интегралов тоже представляет собой очень непростую задачу. Одним из популярных подходов к вычислению фейнмановских интегралов является так называемое секторное разложение. Фейнмановские интегралы могут быть записаны в параметрическом представлении как обычные интегралы по единичному кубу. Однако подобный интеграл содержит в себе особенности по $\varepsilon = (4-d)/2$, которые невозможно явно выделить для произвольного фейнмановского интеграла. Поэтому область интегрирования специальным образом разбивается на так называемые секторы, после чего делаются замены переменных, возвращающие область интегрирования к единичному кубу. В случае правильного подбора секторов в новых переменных можно явно выделить особенности.

Этот подход использовался уже в шестидесятых годах для доказательства теорем о перенормировке. Тогда были изобретены так называемые секторы Хеппа (1966 г.) и Спира (1968 г.). Алгоритмический подход к секторному разложению для вычисления фейнмановских интегралов был впервые применен в 2000 г. Т. Бинотом и Г. Хайнрих. Заложенная в алгоритме стратегия секторного разложения не гарантировала сходимости алгоритма и требовала ручной подстройки. Долгое время существовала только закрытая версия этой программы. Ее современный вариант был опубликован лишь в 2008 г.

В 2008 г. К. Богнер и С. Вайнцирль предложили свои стратегии разложения по секторам. Эти стратегии гарантированно сходятся для случая, когда все кинематические инварианты имеют один знак. Программа Богнера и Вайнцирля была сделана публичной. Однако практика показала, что их программа оказалась неприменимой для достаточно сложных классов интегралов Фейнмана.

Основным недостатком подхода с применением секторного разложения является то, что он нацелен на получение численных ответов, причем точность результатов не превышает шести знаков после запятой. Часто такой точности недостаточно, и секторное разложение используется только для проверки ответов, полученных другим способом (что, конечно, не снижает его ценности ввиду полной автоматизации подхода).

Другим и, наверное, одним из наиболее мощных современных методов аналитического вычисления фейнмановских интегралов является подход, основанный на преобразовании Меллина–Барнса. После проведения некоторых преобразований интеграл представляется в виде многомерного интеграла вдоль комплексных осей от выражения, зависящего от гамма-функций. Этот интеграл может вычисляться аналитически или же просто с достаточно высокой точностью, но для начала необходимо выбрать правильный прямолинейный контур и взять необходимые вычеты.

Помимо редукции и вычисления фейнмановских интегралов важным направлением также является их *асимптотическое разложение*. Оно часто используется в ситуациях, когда заданный интеграл зависит от нескольких параметров, которые можно явно подразделить на “малые” и “большие”. Полная задача может быть слишком сложной для явного вычисления, и тогда

интеграл можно приблизить некоторым количеством первых членов соответствующего асимптотического разложения. Строго говоря, задачу асимптотического разложения фейнмановских интегралов можно поставить следующим образом. Предположим, что интеграл зависит от некоторого параметра t, и нам нужно проследить поведение интеграла при t, стремящемся к нулю. Основная проблема асимптотического разложения заключается в том, что как и в случае вычисления интегралов, мы не можем менять порядок интегрирования и разложения, и поэтому требуются другие методы для асимптотического разложения.

Существуют разные подходы к решению задачи асимптотического разложения. Один из них — это применение универсальной стратегии разложения по областям М. Бенеке и В.А. Смирнова. Однако до последнего времени выделение правильных областей не было строго формализованным.

Научной необходимостью явилась разработка алгоритмов, выполняющих задачи редукции, вычисления и асимптотического разложения фейнмановских интегралов. Кроме того, давно назрела проблема формализации и обоснования некоторых понятий, относящихся к интегралам Фейнмана. Отсюда вытекает как **актуальность** данного исследования, так и постановка проблемы.

Целью диссертационной работы является создание, обоснование и развитие алгоритмов вычисления интегралов Фейнмана, а также практическая реализация этих алгоритмов в виде комплекса компьютерных программ.

Научная новизна:

1. Впервые дано строгое определение понятия мастер-интегралов, что позволило формализовать задачу редукции (работа [22] из приводимого в конце реферата списка). Более того, в 2010 г. автором совместно с А.В. Петуховым было получено доказательство того факта, что количество мастер-интегралов всегда конечно [28, 4]. Эта теорема (теорема 1) обосновывает тот факт, что процесс редукции интегралов к мастер-интегралам сходится.

2. Впервые введено понятие s-базисов — модифицированных базисов Грёбнера, применяемых в задаче редукции фейнмановских интегралов [25, 26, 27].

3. Классическая стратегия секторов Спира впервые представлена в рамках современного подхода рекурсивных стратегий разложения по секторам [16].

4. Впервые дано строгое определение понятия области в методе областей для асимптотического разложения фейнмановских интегралов [3]. Доказано (теорема 6) что в случае полностью положительных функций в альфа-представлении все области задаются гранями максимальной размерности многогранника весов.

5. Разработан ряд новых алгоритмов, позволяющих эффективно осуществлять редукцию, вычисление и асимптотическое разложение фейнмановских интегралов [19, 25, 26, 16, 17, 27, 5, 18, 14].

6. Создан уникальный комплекс программ на основе разработанных автором алгоритмов (см. пункт 5) [3, 19, 23, 5, 18].

Научные результаты, выносимые на защиту:

1. Разработан алгоритм для построения s-базисов [25, 26, 27]. Разработан алгоритм для разрешения соотношений интегрирования по частям, при котором интегралы изучаются по убыванию относительно выбранного упорядочения [19]; доказано, что этот алгоритм сходится (теорема 3). На их основе создана программа `FIRE`, выполняющая редукцию фейнмановских интегралов к мастер-интегралам [19]. Использование программы `FIRE` позволило редуцировать недоступные ранее многопетлевые интегралы высокой сложности.

2. Разработан алгоритм секторного разложения, основанный на геометрическом представлении подынтегрального выражения (стратегия S). Доказано (теорема 4), что стратегия S сходится [18]. Доказано (теорема 5), что в случае евклидовых импульсов стратегия S и сектора Спира приводят к одинаковому набору секторов [5]. Разработан алгоритм для асимптотического разложения фейнмановских интегралов методом, объединяющим представление Меллина–Барнса и секторное разложение [5]. Разработана модификация алгоритма численного интегрирования `Vegas` с использованием библиотек высокой точности [5]. На основе этих алгоритмов создана программа `FIESTA` для численного вычисления фейнмановских интегралов методом разложения по секторам и для асимптотического разложения фейнмановских интегралов по малому параметру [16, 5, 18, 14]. Программа представляет собой уникальный общедоступный инструмент, используемый многими исследователями в своих работах и позволяющий в автоматическом режиме получать до шести знаков численного значения фейнмановских интегралов.

3. Разработан альтернативный алгоритм для выделения особенностей при вычислении интегралов методом Меллина–Барнса [17]. На его основе со-

здана программа `MBresolve` для вычисления фейнмановских интегралов. Она позволяет выделять особенности в задачах, для которых не работали ранее существовавшие инструменты, и приводить к меньшему количеству выражений для интегрирования.

4. Стратегия нахождения областей реализована в виде компьютерного алгоритма [3], на основе которого создана программа `asy`. Она является уникальным инструментом для автоматического определения областей при асимптотическом разложении фейнмановских интегралов.

5. Комплекс описанных выше (а также ряда вспомогательных) программ составлен с учетом специфики развития современных компьютеров. Программа `FIRE` успешно задействует параллелизацию с использованием общей памяти, тем самым выигрывая в производительности. Программа `FIESTA` может задействовать под вычисление требуемого интеграла сразу несколько компьютеров, взаимодействующих по протоколу `Mathlink`. Обе программы как самые ресурсоемкие в комплексе, хранят часть данных на жестком диске для преодоления нехватки оперативной памяти. Все программы, входящие в комплекс, доступны для скачивания по адресу `http://science.sander.su/`.

6. Разработанные численные методы позволили получить ряд физических результатов, из которых особенно сто́ит отметить вычисление трехпетлевого статического кваркового потенциала. Работа с описанием результатов [12] была отмечена Американским физическим обществом и попала в список избранных работ журнала Physical Review Letters.

Достоверность изложенных в работе результатов обеспечивается многократными проверками всех представляемых результатов различными методами. Также она подтверждается большим количеством публикаций в реферируемых журналах с высокими импакт-факторами и активным использованием этих результатов в работах других исследователей.

Практическая значимость диссертационной работы определяется тем, что программы, представленные в работе, активно применяются для физических вычислений не только автором диссертации и его соавторами, но и в большом числе независимых исследований. В частности, на статьи с описаниями алгоритмов `FIRE` и `FIESTA` имеется уже более чем по 50 ссылок.

Программу `FIRE` использовали в своих работах: М. Даулинг, Х. Мондехар, Я. Пиклум, А. Чарнецки (2008–2011); А. Вуоринен (2008); В. Велижанин (2008–2009); Г. Абелоф, А. Герман-де Риддер, М. Ритцман (2009–2011); А. Пак, М. Рогаль, М. Штайнхаузер (2009); Т. Бехер, Г. Белл (2010); М. Горбан, С. Ягер (2010); М. Мишяк, М. Штайнхаузер (2010); Р. Бончани, А. Ферролья, Т. Герман, А. фон. Мантойфель, С. Студерус (2010); Т. Герман, Н. Гловер, Т. Хубер, Н. Икизлерли, С. Студерус (2010); Р. Бужезал, А. Герман-де Риддер, М. Ритцман (2010); В. Бернройтер, К. Богнер, О. Дерререс (2011); Т. Колле, М. Штайнхаузер (2011); Хай-ронг Донг, Фенг Фенг, Ю Сия (2011–2012); А. Грозин, М. Хёшеле, Й. Хофф, М. Штайнхаузер (2011); Х. Асатрян, К. Гройб, А. Кокулу, А. Егиазарян (2011); М. Ватанабе, Ю. Кио, К. Сасаки (2011); Г. Чачамис, М. Хенчински, Х. Д. Мадригал Мартинес, А. Сабио Вера (2012); Ц. Берн, С. Дейвис, Т. Деннен, Ю-тин Хуанг (2012); Б. Еден, П. Хеслоп, Г. Корчемский, В. Смирнов, Э. Сокачев (2012).

Программу `FIESTA` использовали в своих работах: В. Велижанин (2008); Г. Белл (2008); Ю. Кио, Д. Зайдель, М. Штайнхаузер (2008); Р. Бончиани, А.Ферролья (2008); П. Марквард, Я. Пиклум, Д. Зайдель, М. Штайнхаузер (2009); Р. Бончиани, А. Ферролья, Т. Герман, С. Студерус (2009); М. Чакон, А. Митов, Дж. Стёрман (2009); А. Ферролья, М. Нойберт, Б. Пежак, Ли Лин Янг (2009); М. Даулинг, Х.Мондехар, Я. Пиклум, А. Чарнецки (2009–2010); В. Дель Дука, К. Дюр и В. Смирнов (2009–2011); Т. Герман, Н. Гловер, Т. Хубер, Н. Икизлерли, С. Студерус (2010); Пенг Сун, Ганг Хао, Кног-Фенг Сяо (2011); Ц. Берн, С. Дейвис, Т. Деннен, Ю-тин Хуанг (2012); Б. Еден, П. Хеслоп, Г. Корчемский, В. Смирнов, Э. Сокачев (2012). Т. Герман, И. Хен, Т. Хубер (2012).

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались

на семинарах:

- в 2006 г. на семинаре физического факультета университета Билифельда;
- пять раз (2006–2011 гг.) на семинаре Института теоретической физики Технологического Института Карлсруэ (Карлсруэ, Германия);
- в 2010 г. на семинаре "Группы Ли и теория инвариантов" (мехмат, МГУ);
- в 2011 г. на семинаре по методам вычислительной физики Института прикладной математики РАН им. М.В. Келдыша;
- в 2011 г. на семинаре НИВЦ МГУ;
- в 2011 г. на семинаре по компьютерной алгебре факультета ВМК МГУ;
- в 2011 г. на семинаре Отдела теоретической физики высоких энергий НИИЯФ МГУ;

- в 2011 г. на семинаре "Вычислительная математика и приложения" Института вычислительной математики РАН;

на международных конференциях:

- "Calculations for modern and future colliders" — доклад "Applying Groebner Bases to Solve Reduction Problems for Feynman Integrals"; Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 2006;
- "Advanced Computing and Analysis Techniques in Physics Research" — доклад "Reduction of Feynman integrals to master integrals"; National Institute for Subatomic Physics, Амстердам, Нидерланды, 2007;
- "New Methods for Feynman Integrals" — доклад "Feynman integral reduction"; Institute for Particle Physics Phenomenology, Durham University, Дарем, Великобритания, 2008;
- "New Methods for Feynman Integrals" — доклад "Feynman integral evaluation by a sector decomposition approach"; Institute for Particle Physics Phenomenology, Durham University, Дарем, Великобритания, 2008;
- "Calculations for modern and future colliders" — доклад "New methods for Feynman integrals: Feynman integral reduction"; Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 2009;
- "Calculations for modern and future colliders" — доклад "New methods for Feynman integrals: Feynman integral evaluation by a sector decomposition approach"; Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 2009.

Личный вклад. Из всех работ, выполненных в соавторстве, в диссертацию включены положения и результаты, полученные либо лично автором, либо при его определяющем участии в постановке задач и разработке методов их решения.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 29 печатных изданиях, 19 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 9 — в реферируемых журналах "Proceedings of Science" и "Nuclear Physics Proceedings Supplements", публикующих труды конференций и совещаний.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и приложения. Полный объем диссертации **190** страниц текста с 18 иллюстрациями и 7 таблицами. Список литературы содержит **231** наименование.

Содержание работы

Введение

Во введении обосновывается актуальность исследования, проводимого в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, ставятся цели и задачи работы, формулируется научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Основная часть диссертации состоит из пяти глав.

Первая глава

Первая глава посвящена методам редукции фейнмановских интегралов.

Раздел 1.1 — это постановка задачи редукции. В нем определяются фейнмановские интегралы, которые можно считать функциями от индексов — n целочисленных параметров, являющихся показателями степеней пропагаторов в подынтегральном выражении

$$\mathcal{F}(a_1,\ldots,a_n) \;=\; \int\cdots\int \frac{\mathrm{d}^d k_1\ldots \mathrm{d}^d k_h}{E_1^{a_1}\ldots E_n^{a_n}}\,. \tag{1}$$

При редукции используются так называемые соотношения интегрирования по частям — соотношения вида

$$\int\ldots\int \mathrm{d}^d k_1 \mathrm{d}^d k_2 \ldots \frac{\partial}{\partial k_i}\left(p_j \frac{1}{E_1^{a_1}\ldots E_n^{a_n}}\right) = 0\,. \tag{2}$$

Эти соотношения приводятся к виду

$$\sum \alpha_i \mathcal{F}(a_1+b_{i,1},\ldots,a_n+b_{i,n}) = 0\,, \tag{3}$$

где $b_{i,j}$ — фиксированные целые числа (сдвиги на -1, 0 или 1), а α_i — многочлены от a_j. Дальше в соотношения подставляются различные индексы, из чего получается счетное множество соотношений для фейнмановских интегралов с коэффициентами, зависящими от кинематических инвариантов.

Таким образом, сформулированная в разделе задача редукции состоит в том, чтобы использовать соотношения (3) для того, чтобы любой интеграл мог быть представлен в виде линейной комбинации интегралов из небольшого множества.

В **разделе 1.2** дается строгое определение понятия мастер-интегралов — простейших интегралов, через которые должны выражаться все остальные.

Для того, чтобы сформулировать это определение, фейнмановские интегралы (1) рассматриваются как элементы поля функций $\mathbb{F}$ от n переменных с целочисленными аргументами $a_1, a_2, \ldots, a_n$. Это поле представляет собой бесконечномерное векторное пространство, простейший базис которого состоит из элементов $E_{a_1,\ldots,a_n}$, где $E_{a_1,\ldots,a_n}(a'_1,\ldots,a'_n) = \delta_{a_1,a'_1}\ldots\delta_{a_n,a'_n}$.

Соотношения между фейнмановскими интегралами формально являются элементами двойственного векторного пространства $\mathbb{F}^*$, линейными функционалами на $\mathbb{F}$. Имеется в виду, что для любого $r \in \mathbb{F}^*$ есть соответствующее значение $\langle r, f\rangle$ для заданного $f \in \mathbb{F}$. Простейший базис этого пространства состоит из элементов $E^*_{a_1,\ldots,a_n}$, определенных следующим образом:

$$\langle E^*_{a_1,\ldots,a_n}, E_{a'_1,\ldots,a'_n}\rangle = \delta_{a_1,a'_1}\ldots\delta_{a_n,a'_n}\,. \tag{4}$$

Всевозможные соотношения интегрирования по частям порождают бесконечномерное векторное пространство $\mathbb{R} \subset \mathbb{F}^*$. Множество решений $\mathbb{S}$ этих соотношений является пересечением ядер всех функционалов $r \in \mathbb{R}$. Оно представляет собой векторное подпространство пространства $\mathbb{F}$. Фейнмановский интеграл (с учетом зависимости от индексов $a_1,\ldots,a_n$) является элементом пространства $\mathbb{S}$, поскольку интегралы Фейнмана удовлетворяют всем соотношениям интегрирования по частям.

Когда говорится, что один фейнмановский интеграл выражается через другой, обычно подразумевается, что это выражение — следствие рассматриваемых соотношений $\mathbb{R}$. Таким образом, автор дает определение, что один интеграл $\mathcal{F}(a_1,\ldots,a_n)$ *выражается* через другой $\mathcal{F}(a_1^1,\ldots,a_n^1)$, …, $\mathcal{F}(a_1^k,\ldots,a_n^k)$, если существует такой элемент $r \in \mathbb{R}$, что

$$\langle r, \mathcal{F}\rangle = \mathcal{F}(a_1,\ldots,a_n) + \sum k_{a'_1,\ldots,a'_n}\mathcal{F}(a'_1,\ldots,a'_n)\,. \tag{5}$$

Тем самым, в диссертации дается определение *мастер-интегралов* как интегралов, которые нельзя выразить через младшие относительно выбранного упорядочения.

В **разделе 1.3** рассматриваются различные методы редукции фейнмановских интегралов, как разработанные автором, так и существовавшие ранее.

Сначала (в **подразделе 1.3.1**) дается определение секторов — подмножеств индексов с фиксированными знаками (нулевое значение всегда относится к отрицательному направлению). Соответственно, имеется 2^n секторов. Причина введения секторов очень проста — в соотношения, полученные при неположительном значении какого-либо индекса, не входят интегралы, у которых этот индекс положительный. Таким образом, естественным представляется постепенное "сведение" индексов к неположительным значениям. Кроме того, интегралы проще вычисляются, когда число положительных индексов мало.

Далее (в **подразделе 1.3.2**) вводится упорядочение внутри фиксированного сектора. Любой набор индексов в секторе может быть записан как $(a_1,\ldots,a_n)=(p_1+d_1b_1,\ldots,p_n+d_nb_n)$, где $(p_1,\ldots,p_n)=((d_1+1)/2,\ldots,(d_n+1)/2)$ — *угол* сектора, а все b_i неотрицательны; набор $(b_1,\ldots,b_n)$ называется *отступом от угла*. Это представление задает взаимно-однозначное соответствие ϕ между точками $(a_1,\ldots,a_n)$ сектора σ_ν и $(b_1,\ldots,b_n)\in\mathbb{N}^n$. Последнее множество представляет собой полугруппу (относительно сложения $(b_1,\ldots,b_n)+(b'_1,\ldots,b'_n)=(b_1+b'_1,\ldots,b_n+b'_n)$). В этой группе задается любое линейное упорядочение.

Подобные упорядочения используются во всех алгоритмах редукции, в том числе, в классическом алгоритме Лапорта. Этот алгоритм описан в **подразделе 1.3.3**.

Чтобы описать наработки автора, дается краткое введение в базисы Грёбнера в **подразделе 1.3.4** и описывается механизм, позволяющий применять их к редукции интегралов Фейнмана, основанный на классическом алгоритме Бухбергера. Затем, в **подразделе 1.3.5**, дано определение s-базисов — модифицированных базисов Грёбнера. Также приводится предложенная автором модификация алгоритма Бухбергера, строящая эти базисы.

В **разделе 1.4** представлена программа `FIRE`, осуществляющая редукцию фейнмановских интегралов. Программа удобна для использования — достаточно описать задачу, а затем запросить один или несколько интегралов для редукции.

Сначала (в **подразделе 1.4.1**) описана логика работы алгоритма. Основная идея состоит в том, что в каждый момент времени программа хранит так называемые *правильные выражения* для фейнмановских интегралов; каждый интеграл $\mathcal{F}(a_1,\ldots,a_n)$ выражается как линейная комбинация интегралов *младше*, чем $\mathcal{F}(a_1,\ldots,a_n)$.

В допущении, что имеется способ строить правильное выражение для каждого интеграла, основной алгоритм выглядит следующим образом (на вход подаются требуемые интегралы):

FIRE

1. $RequiredIntegrals$=Input
2. **Пока** $RequiredIntegrals$ не пусто
    3. $Y = RequiredIntegrals[[1]]$ (первый элемент)
    4. Убрать первый элемент у $RequiredIntegrals$
    5. **Получить правильное выражение для** Y — линейную комбинацию интегралов; их множество мы обозначим как S
    6. Взять подмножество S' множества S, содержащее интегралы, для которых еще не были построены правильные выражения
    7. Объединить $RequiredIntegrals$ с S'
8. **КонецЦикла**
9. Отсортировать полный список встречавшихся интегралов по убыванию
10. **Для всех** элементов Y этого множества, начиная с младших
    11. Взять правильное выражение для Y через $(X_1,\ldots,X_k)$ и подставить в него правильные выражения для X_i
12. **КонецЦикла**
13. Вернуть полученные правильные выражения для Input

Другими словами, программа начинает с исходных интегралов, получает для них правильные выражения, смотрит на полученные интегралы и.т.д. В конце проводятся обратные подстановки. Положительным моментом является то, что длины выражений ограничены, на прямом проходе — длиной получаемых правильных выражений, на обратном — количеством мастер-интегралов.

Возможность такой процедуры основывается на умении быстро получать правильные выражения. Далее в диссертации обсуждаются источники правильных выражений. Во-первых, это s-базисы, модификация базисов Грёбнера, о которой было сказано в предыдущем разделе. Если в секторе можно построить базис для редукции, `FIRE` его может использовать для ускорения работы и применения правил в этом секторе вместо разрешения системы уравнений.

Перечислены и иные источники, но в случае, когда они отсутствуют, алгоритму приходится обходиться без них. Самый прямолинейный и всегда работающий способ — это алгоритм Лапорты. Он также реализован в программе `FIRE`. Отличительной особенностью является то, что подбор отступов от угла сектора для построения выражений выполняется автоматически, пользователю лишь необходимо подать на вход описание задачи и список требуемых интегралов.

Далее (в **подразделе 1.4.2**) обсуждается, как устроена параллелизация алгоритма. Она основана на том факте, что в секторах одного уровня можно работать практически независимо. Соотношения, полученные подстановкой в IBP точек данного сектора, не включают в себя точек из секторов большего или такого же уровня. Причина заключается в том, что в соотношения IBP оператор положительного сдвига всегда входит вместе с оператором умножения.

Тем не менее, точки, относящиеся к более низким секторам, входят в эти соотношения. Тем самым требуется использование общей базы данных.

Соответственно, параллелизация алгоритма устроена следующим образом. На вход подается список интегралов, и алгоритм отбирает старшие секторы одного уровня, в которых содержатся требуемые интегралы. Эти секторы распределяются между параллельно работающими ядрами процессора. Если их оказывается больше, чем ядер, то ядро, закончившее работу первым, получает дополнительное задание. После того, как работа в секторах одного уровня закончена, код вычисляет интегралы, необходимые на следующем уровне, и уже дальше работает с ними аналогичным способом. Таким образом, в программе организована балансировка нагрузки — в общем случае количество секторов одного уровня существенно превосходит количество задействованных ядер процессора, поэтому нагрузка более-менее равномерно распределяется между ядрами, приводя к приросту производительности.

В конце главы, в **разделе 1.5**, доказываются теоремы конечности. Во-первых, формулируется

Теорема 1. *Число мастер-интегралов всегда конечно.*

Конструктивного доказательства этой теоремы не существует; тем не менее, наличие такой теоремы является обоснованием алгоритмов редукции фейнмановских интегралов.

В разделе эта теорема сводится к следующему математическому утверждению из области алгебраической геометрии:

Теорема 2. *Пусть G — алгебраическая группа, действующая на векторном пространстве X с конечным количеством орбит. Пусть $\chi : \mathrm{g} \to \mathbb{F}$ — характер (=гомоморфизм алгебр Ли). Для любого набора функций $\mathrm{E}_1, \ldots, \mathrm{E}_n \in \mathbb{F}[X]$ алгебра Ли g действует на кольце регулярных функций $\mathcal{F}$ на дополнении в X к гиперплоскостям, определенным функциями E_i. Утверждение теоремы заключается в том, что фактор $(\mathrm{g} - \chi(\mathrm{g}))\mathcal{F} \backslash \mathcal{F}$ конечномерен.*

Кроме того, на основании теоремы 1 доказывается утверждение:

Теорема 3. *Алгоритм редукции, лежащий в основе программы FIRE, сходится. Имеется некоторый конечный набор мастер-интегралов, такой что описанный алгоритм представляет интеграл с любыми индексами как линейную комбинацию мастер-интегралов.*

В **разделе 1.6** подводятся итоги главы. Статьи, относящиеся к первой главе: [29, 19, 25, 4, 26, 22, 27].

Вторая глава

Вторая глава описывает методы вычисления фейнмановских интегралов. Она разбита на два раздела, первый из которых **2.1** посвящен вычислению методом разложения по секторам, а второй **2.2** — представлению Меллина–Барнса.

Раздел 2.1 начинается с **подраздела 2.1.1**, где описывается параметрическое представление фейнмановских интегралов. Напомним, что рассматриваются интегралы вида

$$\mathcal{F}(a_1, \ldots, a_n) \;=\; \int \cdots \int \frac{\mathrm{d}^d k_1 \ldots \mathrm{d}^d k_l}{E_1^{a_1} \ldots E_n^{a_n}}\,, \qquad (6)$$

где $d = 4 - 2\varepsilon$, $1/E_n$ — пропагаторы.

После некоторых замен и подстановок выводится формула вида

$$\mathcal{F}(a_1, \ldots, a_n) = \\ \frac{\Gamma(A - ld/2)}{\prod_{j=1}^{n} \Gamma(a_j)} \int_{x_j \geq 0} dx_i \ldots dx_n \delta \left(1 - \sum_{i=1}^{n} x_i\right) \left(\prod_{j=1}^{n} x_j^{a_j - 1}\right) \frac{U^{A-(l+1)d/2}}{F^{A-ld/2}}, \qquad (7)$$

где $A = \sum_{i=1}^{n} a_n$, а U и F — конструктивно определенные полиномы от x_i.

В **подразделе 2.1.2** описано так называемое разложение по секторам. После разложения области интегрирования на *первичные секторы* и замены переменных предыдущая формула сводится к линейной комбинации интегралов следующего вида:

$$\int_{x_j=0}^{1} dx_i \ldots dx_{n'} \left(\prod_{j=1}^{n'} x_j^{a_j - 1}\right) \frac{U^{A-(l+1)d/2}}{F^{A-ld/2}} \qquad (8)$$

Задача состоит в том, чтобы разложить подынтегральные выражения по ε и выполнить численное интегрирование. Однако, такое возможно только в случае, когда $\frac{U^{A-(l+1)d/2}}{F^{A-ld/2}}$ не имеет особенностей по ε.

Существуют различные способы приведения подынтегрального выражения к требуемому виду. Изначально использовались классические секторы Хеппа (1966) и Спира (1968), рассмотренные в **подразделе 2.1.3**. Они могут быть применены только к фейнмановским интегралам при евклидовых внешних импульсах (любая сумма внешних импульсов пространственно-подобна).

В подразделе дается современная трактовка секторов Хеппа и Спира, позволяющая переформулировать их в рамках рекурсивного построения секторов.

Тем самым осуществляется переход к **подразделу 2.1.4**, где формулируется современное видение секторного разложения. Для преобразования подынтегрального выражения к требуемому виду выполняется описанный в разделе процесс, называемый *разложением по секторам.* Он определяется рекурсивно, шаг рекурсии состоит в разбиении области интегрирования на части (секторы) и последующей замене переменных таким образом, что в новых переменных области интегрирования превращаются опять в единичные кубы.

Способ выбора областей и соответствующих замен переменных называется *стратегией секторного разложения.* В подразделе описан принцип работы общеизвестных стратегий разложения по секторам.

Далее (в **подразделе 2.1.5**) определяется стратегия S, изобретенная автором и основанная на анализе "нижних" граней многогранника весов, отвечающего подынтегральному выражению.

Устроена она следующим образом: рассматривается множество весов W многочлена F_Γ, определенное как множество всевозможных $(a_1,\dots,a_n)$, где $cx_1^{a_1}\dots x_n^{a_n}$ — один из мономов многочлена F_Γ. Говорится, что один вес старше другого, если их разница является набором неотрицательных чисел. Рассматривается выпуклая оболочка $\mathrm{conv}(W)$ множества W и выбирается одна из его граней G максимальной размерности, видимая из начала координат. Берется нормальный вектор v к G, рассматривается множество $I=\{i|v_i\neq 0\}$, область интегрирования делится на m частей при помощи

$$S_l=\{(x_1,\dots,x_n)|x_{i_l}^{a_{i_l}}\geq x_{i_k}^{a_{i_k}}\forall i_k\in I\},$$

где $\{i_1,\dots i_m\}=I$, $n=L-1$, а степени a_i определены через

$$\begin{pmatrix} a_{i_1}\\ a_{i_2}\\ a_{i_3}\\ \vdots\\ a_{i_m}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0&1&1&\dots&1\\ 1&0&1&\dots&1\\ 1&1&0&\dots&1\\ \vdots&\vdots&\vdots&&\vdots\\ 1&1&1&\dots&0\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} v_{i_1}\\ v_{i_2}\\ v_{i_3}\\ \vdots\\ v_{i_m}\end{pmatrix} \tag{9}$$

Замены переменных в S_l определяются как

$$x_i=x_i'\forall i\notin I$$

$$x_{i_l}=(x')_{i_l}^{v_{i_l}}$$

$$x_{i_k}=(x')_{i_l}^{v_{i_k}}x_{i_k}'\ \forall i\in I,k\neq l.$$

В подразделе доказано утверждение:

Теорема 4. *Стратегия S сходится.*

Как хорошо известно, при евклидовых внешних импульсах секторы Спира дает минимальное количеству секторов. В подразделе также доказывается:

Теорема 5. *В случае евклидовых импульсов стратегия S и секторы Спира приводят к одинаковому набору секторов.*

Тем самым, в случае евклидовых импульсов и стратегия S дает оптимальный результат. Но она работает на существенно более широком классе интегралов, также приводя к относительно небольшому количеству секторов.

В **подразделе 2.1.6** рассмотрено предразрешение — выявление областей, связанных с мономами разных знаков. Стратегии разложения по секторам гарантированно сходятся, только если все члены функции F положительны. Однако, они могут работать и с более широким кругом задач. В случае, когда функция F имеет везде один знак, но может зануляться не только при обращении в нуль части переменных интегрирования, работают обычные методы разложения по секторам.

В более общем случае, когда функция имеет один знак, но может зануляться не только на границе, введен алгоритм для выделения полных квадратов разностей переменных внутри функции F и соответствующих разбиений и замены переменных.

Алгоритм "предразрешения" заключается в поиске пар переменных интегрирования, произведения которых входят в мономы функции F с отрицательным знаком. Для всех таких пар делается попытка разбить область интегрирования (на этом этапе — бесконечный квадрант положительных значений) на две: в одной больше одна переменная, в другой — другая. Делается замена переменных $y_1=x_1$, $y_2=x_2-x_1$, тем самым форма области сохраняется.

В **подразделе 2.1.7** описывается программа `FIESTA`, выполняющая автоматическое численное вычисление фейнмановских интегралов.

Эта программа уникальна в своем роде и позволяет пользователю просто описать интеграл и запустить вычисление. Естественно, она имеет свои ограничения — для сложных интегралов вычисление может требовать большого количества времени и памяти. Тем не менее, часто даже прямолинейного применения программы достаточно для получения требуемого результата.

Разложение по секторам происходит в автоматическом режиме. В программе реализованы стратегии A, B, S, X, стратегия секторов Спира, а также более поздняя стратегия KU (Канеко, 2009). По умолчанию выбрана стратегия S как сходящаяся на наибольшем классе интегралов и превосходящая стратегию B. Но существуют случаи, когда лучше выбрать другую стратегию, и в разделе приводятся советы по выбору.

После разрешения особенностей получаются выражения вида

$$\int_{x_j=0}^{1} \mathrm{d}x_i \ldots \mathrm{d}x_n \left(\prod_{j=1}^{n} x_j^{a_j-1+b_j\varepsilon}\right) Z, \tag{10}$$

где Z не имеет особенностей.

В разделе описаны действия, которые совершает программа для выделения таких особенностей. А именно, выражение разбивается на явно интегрируемый член и остаток, который не имеет особенностей. Описаны различные методы выделения особенностей и показано, который из них является самым оптимальным.

Далее в разделе описано, как `FIESTA` осуществляет численное интегрирование. Для этого используется отдельно написанная программа, поскольку `Mathematica` не способна осуществить вычисление с требуемой точностью. Здесь возникает следующая проблема: что нельзя просто создать программу на C, содержащую подынтегральное выражение и откомпилировать ее по той причине, что время компиляции для всех известных компиляторов растет экспоненциально.

Соответственно, в диссертации описано, как была решена эта проблема. А именно, был создан собственный "компилятор" на c++, переводящий поступающую строку во внутреннюю структуру, что позволяет впоследствии быстро вычислять функцию в любой точке.

Вторая проблема, как описано в этом разделе, возникает из-за специфической структуры подынтегральных выражений. А именно, по причине проведенного разложения в ряд Тейлора и остаток, функция представляет собой сумму отдельных членов, способных быстро стремиться к бесконечности при малых значениях переменных интегрирования. Например, два члена функции могут иметь порядок 10^{20}, а их разность — порядок 10^{-1}. Тем самым

около 20 значащих цифр в десятичном представлении этих чисел сокращаются, и результат зависит только от последующих цифр. Но даже при двойной точности вычислений компьютер хранит только около 14-15 цифр при переводе в десятичное представление.

В диссертации для решения этой задачи была разработана модификация алгоритма численного интегрирования функций с использованием арифметики высокой точности для интегрирования. Были протестировали различные библиотеки и выбрана библиотека `GNU mpfr`[1].

В заключение разбирается, как устроена параллелизация в программе `FIESTA`. Первая часть — параллелизация в `Wolfram Mathematica`. Сначала программа запускает несколько подчиненных процессов, которые смогут независимо работать с первичными секторами. После завершения секторного разложения программа может работать в секторах совершенно независимо, тем самым, задача может быть эффективно параллелизована. Узким местом может оставаться работа с диском при помощи программы `QLink` для хранения промежуточных данных во всех секторах (в противном случае было бы легко переполнить оперативную память). В программе `FIESTA` только основной процесс использует базу данных; для правильного распределения заданий была реализована своя система очередей.

Интегрирование может выполняться в рамках пакета `Mathematica` и быть параллелизовано аналогичным образом. Однако, существенно эффективней оказывается использовать специально разработанную программу интегрирования на c++. Параллелизация на этой стадии реализована за счет того, что `Mathematica` запускает независимые процессы `CIntegrate` и распределяет между ними интегрирование.

Завершается раздел подробным анализом того выигрыша во времени, которого можно добиться, запуская программу `FIESTA` в параллельном режиме, а также примером применения программы.

В **разделе 2.2** разбирается другой подход к вычислению фейнмановских интегралов, основанный на представлении Меллина–Барнса (MB). Сначала объяснено, что собой представляет этот метод.

А именно, метод MB-представления — один из способов вычисления многопетлевых фейнмановских интегралов, основывающийся на формуле

$$\frac{1}{(X+Y)^{\lambda}} = \frac{1}{\Gamma(\lambda)}\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{+i\infty} \mathrm{d}z\,\Gamma(\lambda+z)\Gamma(-z)\frac{Y^z}{X^{\lambda+z}}\,, \tag{11}$$

[1]GNU MPFR `http://www.mpfr.org/` — кроссплатформенная C-библиотека для вычислений с плавающей точкой с произвольной точностью, основанная на библиотеке GMP `http://gmplib.org/`

называемой MB-представлением и применяемой с той целью, чтобы заменить сумму двух слагаемых в какой-либо степени на их произведение в некоторых степенях. Согласно предписанию преобразования, контур интегрирования должен быть выбран таким образом, чтобы полюса с $\Gamma(\ldots+z)$-зависимостью находились слева от контура, а с $\Gamma(\ldots-z)$-зависимостью — справа.

Вопрос вывода MB-представления не рассматривается в диссертации; напротив, допускается, что уже получено представление вида

$$\frac{1}{(2\pi i)^n}\int_{-i\infty}^{+i\infty}\cdots\int_{-i\infty}^{+i\infty}\frac{\prod_i\Gamma\left(a_i+b_i\varepsilon+\sum_j c_{ij}z_j\right)}{\prod_i\Gamma\left(a'_i+b'_i\varepsilon+\sum_j c'_{ij}z_j\right)}\prod_k x_k^{d_k}\prod_{l=1}^{n}\mathrm{d}z_l\,, \tag{12}$$

где $\varepsilon=(4-d)/2$ — параметр размерной регуляризации, $a_i,\ldots,c'_{ij}$ — рациональные числа, x_k — отношения кинематических инвариантов и/или масс; степени d_k являются линейными комбинациями ε и переменных z_i.

Если такой интеграл достаточно сложен, то прямое вычисление невозможно, и нужно осуществить разложение по ε, что достаточно при вычислении размерно-регуляризованных интегралов. Это и является задачей, рассматриваемой в разделе.

Основная проблема состоит в выборе контура — ведь предписания приводят к противоречивым требованиям для выбора прямолинейного контура, поэтому для правильного разложения необходимо учитывать вычеты.

В **подразделе 2.2.1** вводится модификация классической стратегии выбора контуров.

Напомним, что для $\Gamma(z+a)$ имеется предписание $\mathrm{Re}z<-a$ (если мы интегрируем по z по вертикальной оси). Определим также функцию $\Gamma^{(n)}(z+a)$. Она будет равна обычной гамма-функции, но ее наличие в интеграле будет подразумевать другое предписание для контура, а именно $-a+n-1<\mathrm{Re}z<-a+n$. Аналогично определяются такие функции и для зависимости с $-z$.

Автор предлагает искать контуры, по которым мы будем интегрировать в конце, и чтобы при этом предписания нарушались “минимальным образом” (строгое определение можно найти в диссертации).

В **подразделе 2.2.2** формализован алгоритм поиска контуров и описана программа `MBresolve`, представляющая собой его реализацию Схематически алгоритм можно описать следующим образом:

`MBresolve[function,cont_pr]`

1. найти точку с минимальным нарушением предписаний контуров.
2. **Если** число нарушений равно нулю, **возвратить** `function` как ответ
3. $l=$ список нарушенных предписаний

4. **Для** каждого $\{x,n\}$ в l выполняем
5. **Попытка** вычислить `t1 = MBresolve[function,cont_pr′]` где `cont_pr′` получаются заменой $\{x,n\}$ на $\{x,n+1\}$
6. **В случае ошибки** переходим к следующему циклу
7. представим x как $c\alpha+r$, где $c\neq 0$, α — одна из переменных интегрирования, и r не зависит от α
8. **Возвратить** `t1 - Sign[`c`]MBresolve[MBresidue[function,`$\{\alpha,-r/c\}$`],cont_pr″]`, где `cont_pr″` получаются из `cont_pr` удалением $\{x,n\}$ и заменой $\alpha\to -r/c$ во всех остальных функциях
9. **Конец**
10. **Подняться на уровень рекурсии вверх с ошибкой**

В завершение в **подразделе 2.2.3** упоминается алгоритм `PSLQ` — поиск целочисленных соотношений между числами $x_1,\ldots x_n$ (заданными с фиксированной точностью), то есть соотношений типа

$$a_1x_1+\ldots a_nx_n=0\,,$$

где не все a_i равны нулю. Интерес представляет поиск такого решения с минимально возможными (по модулю) коэффициентами. В таком случае, если нам известен ответ с большой точностью и набор иррациональных чисел, через которые он должен выражаться, мы можем найти это выражение. Естественно, нет стопроцентной гарантии, что это представление является верным. Однако статистически можно оценить вероятность того, что ответ был найден.

Этот алгоритм часто применяется в работах автора для получения аналитического ответа после того, как был найден одним из описанных выше методов численный ответ.

В **разделе 2.3** подводятся итоги главы. Статьи, относящиеся ко второй главе: [28, 7, 2, 16, 17, 5, 18].

Третья глава

В третьей главе описаны результаты автора, относящиеся к асимптотическому разложению. Часто встречаются ситуации, когда поставленная задача оказывается слишком сложной для явного вычисления, но при этом заданный интеграл зависит от нескольких параметров, которые можно явно подразделить на “малые” и “большие”. Тогда интеграл можно приблизить некоторым количеством первых членов соответствующего асимптотического разложения. Строго говоря, задачу асимптотического разложения фейнмановских интегралов можно поставить следующим образом. Предположим, что интеграл зависит от некоторого параметра t и надо проследить поведение интеграла при t, стремящемся к нулю.

В главе рассмотрено два подхода к асимптотическому разложению.

В **разделе 3.1** описан так называемый метод областей. Области — это некоторые преобразования подынтегрального выражения. Утверждается, что сумма интегралов разложений по t по областям равна разложению интеграла. Причина происхождения такого название ("области") заключается в том, что в каждой области подразумевается свое соотношение между параметрами. Область интегрирования действительно распадается на каким-то образом определяемые подобласти. Но так как каждой подобласти соответствует своя замена переменных и производится интегрирование по всему пространству, нет никакого явного объяснения тому факту, что метод областей работает. Более того, до последнего времени не имелось строгого определения областей — их нахождение основывалось на интуиции и опыте.

В разделе описан поход, разработанный автором совместно с А. Паком и позволивший формализовать метод областей. В нем рассматривается общий случай l-петлевого фейнмановского интеграла, имеющего альфа-представление вида

$$\begin{aligned}&\mathcal{F}(a_1,...,a_n)=\\&c\int_0^1 dx_1...dx_n\;\delta(1-x_1-...-x_n)x_1^{a_1-1}...x_n^{a_n-1}U^aF^b,\end{aligned}\tag{13}$$

где коэффициент c и степени a и b зависят только от l, d, и a_i. U и F — однородные многочлены (степеней l и $l+1$) от переменных интегрирования, F также зависит от кинематических инвариантов.

Геометрический подход к асимптотическому разложению, предложенный в **подразделе 3.1.1**, состоит в следующем. Рассматривается интеграл в альфа-представлении (13) с переменными интегрирования $x_1,...,x_n$ и малым параметром разложения ρ. Каждому моному многочлена F отвечает его набор степеней по $x_1,...,x_n$ и ρ.

$$\rho^{r_0}x_1^{r_1}...x_n^{r_n}\to(r_1,...,r_n,r_0),\tag{14}$$

всему многочлену F отвечает набор $\{F\}$ из M точек в $(n+1)$-мерном векторном пространстве. Из однородности F следует, что все эти точки лежат в n-мерной гиперплоскости, удовлетворяющей уравнению $r_1+...+r_n=l+1$. Члены U не зависят от ρ, поэтому множество $\{U\}$ содержится в$(n-2)$-мерной гиперплоскости, отвечающей условиям $r_0=0$, $r_1+...+r_n=l$.

Если зафиксировать масштабирование альфа-параметров $x_i\sim\rho^{v_i}$, то степень роста монома будет определяться как $\rho^{r_0}x_1^{r_1}...x_n^{r_n}\sim\rho^{r_0+v_1r_1+...+r_nv_n}\sim\rho^{\vec{r}\vec{v}}$, где $\vec{r}=(r_0,...,r_n)$ — элемент множества $\{F\}$ и $\vec{v}=(v_1,...,v_n,1)$.

Любому выбору вектора $\vec{v}$ соответствует масштабирование переменных x_i. В разделе доказывается:

Теорема 6. *Пусть функция F полностью положительна. Тогда если вектор $(v_1,\ldots,v_n)$ задает ненулевую область, то вектор $\vec{v}=(v_1,\ldots,v_n,1)$ ортогонален одной из граней максимальной размерности многогранника весов* $\mathrm{conv}\{UF\}$ *и смотрит "внутрь" многогранника.*

Затем приводятся два примера, поясняющие логику определения областей.

В **подразделе 3.1.2** описана реализация вышеуказанного алгоритма в виде программы `asy`. Основная проблема сводится к известной задаче вычислительной геометрии — к построению выпуклой оболочки множества из M точек в n-мерном пространстве Для этих целей используется алгоритм `QHull`.

В **разделе 3.2** разбирается другой метод асимптотического разложения, комбинирующий MB-представление с секторным разложением. Как оказывается, описанное во второй главе разложение по секторам также может быть применено для получения асимптотического разложения. В диссертации рассматривается случай, когда кинематические инварианты и массы можно разбить на две группы,

$$\sum_{l=1}^{L-1}m_l^2\prod_{l=l'}^{L-1}\alpha_{l'}+m_L^2=W_1+W_2\;,\tag{15}$$

члены из группы W_1 намного меньше членов группы W_2. После введения параметра разложения λ, путем домножения на него членов первой группы получается частный случай пределов, рассматривавшихся в предыдущей части (стратегия областей). Эти члены разделяются при помощи введения однократного MB-интеграла,

$$\frac{\Gamma(a-hd/2)}{(\lambda W_1+W_2)^{a-hd/2}}=\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{+i\infty}\mathrm{d}z\,\lambda^z\frac{\Gamma(a-hd/2+z)\Gamma(-z)}{W_1^{-z}W_2^{a-hd/2+z}}\tag{16}$$

таким образом

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}^{(L)} &= \frac{\left(i\pi^{d/2}\right)^h}{\prod_l \Gamma(a_l)} \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \mathrm{d}z \, \Gamma(a - hd/2 + z)\Gamma(-z)\lambda^z \\
&\times \int_0^1 \ldots \int_0^1 \hat{\mathcal{U}}^{a-(h+1)d/2} \, W_1^z \, W_2^{-a+hd/2-z} \prod_l^{L-1} \left(\alpha_l^{a_l-1}\alpha_l\right) \quad . \qquad (17)
\end{aligned}
$$

Идея использования MB-представления заключается в том, чтобы свести изучение асимптотики к анализу полюсов по переменной интегрирования z. Чтобы выбрать члены асимптотики в пределе $\lambda \to 0$, контур интегрирования замыкается справа и изучаются вычеты по z. В дополнение к полюсам явно присутствующей гамма-функции $\Gamma(-z)$ при $z = 0, 1, 2, \ldots$ имеются полюсы, возникающие из параметрического разложения.

В **подразделе 3.2.1** рассказывается, как предложенный выше алгоритм был реализован в виде модуля в программе `FIESTA`. Он состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Особенности интеграла разрешаются при помощи разложения по секторам. Вместо двух подынтегральных функций имеется три, U, W_1 и W_2, возведенные в степени, зависящие не только от ε, но и от переменной интегрирования z. В результате этой процедуры получается сумма параметрических интегралов, в каждом из которых функции правильно факторизованы. Таким образом, каждый из полученных параметрических интегралов представляет собой интеграл по единичному кубу (по переменным $t_1, \ldots, t_{L-1}$) от выражения $\prod t_i^{r_i-1}$, помноженного на положительную функцию. Здесь степени r_i имеют вид $b_i\varepsilon + c_i z + n_i$, где b_i, c_i, n_i рациональны.

Шаг 2. Выделяются сингулярности по ε, возникающие из-за интегрирования по z. Каждый интеграл от $t_i^{b_i\varepsilon+c_iz+n_i-1}$ порождает z-зависимость типа $\Gamma\left(b_i\varepsilon + c_i z + n_i\right)$. Представляют интерес только зависимости с $c_i < 0$.

С использованием вычитания начальных членов ряда Тейлора каждый интеграл превращается в сумму остатка и интегралов, у которых интегрирование по t_i может быть взято явно. Остаток (если взять достаточное количество членов ряда Тейлора) может быть отброшен, поскольку он стремится к нулю пропорционально большой степени параметра λ. В то же время явное интегрирование членов ряда Тейлора приводит к рациональной сингулярности по z. В этих точках вычеты берутся так же, как и при явной функции $\Gamma(-z)$.

Шаг 3. Каждый полученный интеграл является секторным интегралом с правильной факторизацией, поэтому он может быть вычислен численно программой `FIESTA`.

В **разделе 3.3** подводятся итоги главы. Статьи, относящиеся к третьей главе: [3, 5, 18].

Первые три главы имеют больше теоретическое значение: в них описаны методы и алгоритмы для редукции, вычисления и асимптотического разложения фейнмановских интегралов.

Четвертая глава

В четвертой главе представлен программный комплекс, основанный на описанных выше алгоритмах, даются инструкции по его применению. Для всех компьютерных программ, входящих в состав комплекса, приводятся рекомендации по подбору опций для повышения эффективности вычисления фейнмановских интегралов.

В **разделе 4.1** даны инструкции к программе `FIRE`. В **подразделе 4.1.1** описан синтаксис основной программы — команды, которые нужно дать, чтобы запустить вычисление, различные опции. В **подразделе 4.1.2** приводится синтаксис программы построения s-базисов — их наличие может ускорить работу основной программы. В **подразделе 4.1.3** приводятся примеры, а в **подразделе 4.1.4** — рекомендации по эффективному использованию программы.

В **разделе 4.2** даны инструкции к программе `FIESTA`, позволяющие описать искомый интеграл и выполнить вычисление или асимптотическое разложение. В **подразделе 4.2.1** описан процесс установки этой программы, в **подразделе 4.2.2** — ее синтаксис с примерами. в **подразделе 4.2.3** — советы по выбору опций для оптимальной работы программы.

В **разделе 4.3** даны инструкции к программе `MBresolve`, осуществляющей поиск контуров для вычисления фейнмановских интегралов методом Меллина–Барнса; приводится пример использования программы.

В **разделе 4.4** описана программа поиска областей `asy`, использующаяся для разложения методом областей. Чтобы ее задействовать, необходимо установить пакет с открытым кодом `QHull`, выполняющий поиск выпуклых оболочек многогранников. В разделе приводится синтаксис программы и примеры ее применения.

Раздел 4.5 посвящен остальным утилитам.

В **подразделе 4.5.1** описана программа `QLink`. Для работы очень многие используют программу `Wolfram Mathematica`; в частности, на ней написана публичная версия `FIRE`. Будучи универсальным и очень удобным продуктом, `Mathematica` испытывает некоторые проблемы, связанные с использованием памяти и производительностью.

Для того, чтобы преодолеть эти проблемы, была разработана программа `QLink`. Она написана на c++ с использованием библиотеки `MathLink` и позволяет обращаться из `Mathematica` к движкам баз данных `QDBM`[2], `TokyoCabinet`[3] и `KyotoCabinet`[4].

В подразделе подробно описан синтаксис использования программы `QLink`.

В **подразделе 4.5.2** описана программа `FLink`, предназначенная для борьбы с другим недостатком пакета `Mathematica`. Он состоит в том, что в отдельных случаях полиномиальная алгебра пакета `Mathematica` сильно отстает по эффективности от конкурентов. Программа `FLink` позволяет использовать закрытую консольную программу `Fermat`[5] для алгебраических вычислений. Она написана на c++ с использованием библиотеки `MathLink` и позволяет запускать `Fermat` из `Mathematica` и вызывать алгебраические вычисления. `Fermat` эффективно приводит к общему знаменателю сумму двух рациональных функций и сокращает наибольший общий делитель у числителя и знаменателя.

В **подразделе 4.5.3** описана программа `UF`. На вход ей подается набор петлевых импульсов, пропагаторов и количество петель, на выходе мы получаем параметрическое представление. Это представление раньше оно выводилось вручную, иногда даже с использованием данных о структуре фейнмановской диаграммы. Оно используется для работы описанной выше программы `FIESTA` и для многих других задач.

В **подразделе 4.5.4** описана программа `IBP`. Она применяется для автоматической генерации соотношений `IBP` на основе знания о петлевых и внешних импульсах и пропагаторах. Эти соотношения используются, в частности, в программе `FIRE`.

В **разделе 4.6** подводятся итоги главы. Статьи, относящиеся к четвертой главе: [3, 19, 16, 17, 5, 18].

Пятая глава

Благодаря тому, что автором были созданы эти алгоритмы, были получены разнообразные физические результаты. Самые важные из результатов, полученных совместно с соавторами, описаны в пятой главе.

В **разделе 5.1** приведен анализ декаплинга c-кварковых петель в процессах с участием b-кварка. Коэффициенты декаплинга для поля тяжелого кварка и смешанного кваркового тока вычислены в трехпетлевом приближении. Последний результат был получен, чтобы улучшить точность вычисления f_B на основе моделирования решетки в рамках эффективной теории тяжелого кварка (без c-кварковых петель).

[2]http://sourceforge.net/projects/qdbm/
[3]http://fallabs.com/tokyocabinet/
[4]http://fallabs.com/kyotocabinet/
[5]http://home.bway.net/lewis/

В **разделах 5.1.1 и 5.1.2** рассматриваются два класса интегралов, для которых понадобилась редукция, а в **разделе 5.1.3** приводятся результаты.

Раздел 5.2 посвящен потенциалу взаимодействия двух тяжелых кварков. Значение этого потенциала нужно для описания процессов рождения пары t-кварк и $\bar{t}$-кварк на пороге и для описания связанных состояний c-кварка и b-кварка. Кроме того, он важен для понимания фундаментальных явлений КХД, таких как конфайнмент.

В разделе 5.2.1 описано получение всех трехпетлевых поправок к статическому потенциалу, в **разделе 5.2.2** приведено их значение, в **разделе 5.2.3** рассмотрены различные применения этого результата.

В **разделе 5.3** изучаются кварковые и глюонные трехпетлевые формфакторы. Рассмотрено получение основных калибровочно-инвариантных компонент для адронного рождения бозона Хиггса и процесса $e^+e^- \to$ 2 струи. Этот результат является первой посчитанной поправкой третьего порядка для трехточечной функции в квантовой хромодинамике.

В **разделе 5.3.1** рассмотрены два подхода к редукции требуемой задачи, а в **разделе 5.3.2** приведены результаты и рассмотрены их потенциальные применения.

В **разделе 5.4** изучены низкоэнергетические моменты корреляторов тяжелых кварков в четырехпетлевом приближении. В работе вычислены второй и третий моменты для векторного, аксиального и скалярного токов и третий и четвертый моменты для псевдо-скалярных токов.

Отдельно в **разделе 5.4.1** рассмотрена техника, связанная с применением собственно-энергетических вставок. Эта специально разработанная методика применялась для задачи редукции требуемых диаграмм. В **разделе 5.4.2** приведены результаты.

Статьи, относящиеся к пятой главе: [15, 24, 6, 1, 8, 23, 20, 21, 9, 10, 11, 12, 13, 14].

Одним из результатов диссертации является доказательство теоремы конечности числа мастер-интегралов (теорема 1). Автору диссертации принадлежит свéдение этого физического утверждения к математическому утверждению из области алгебраической геометрии (теорема 2). Доказательство теоремы 2 принадлежит не автору, а его соавтору, поэтому оно приведено в приложении.

Заключение

В заключении подводятся итоги работы автора, определяется их теоретическое и практическое значение.

На основании анализа состояния современной науки в области вычисления фейнмановских интегралов автором была выявлена определенная потребность в мощных алгоритмах для трех задач, возникающих при вычислении фейнмановских интегралов, — для редукции к мастер-интегралам, для вычисления последних и для подхода с использованием асимптотического разложения (применяемого в случаях, когда полная задача имеет слишком высокую сложность). В диссертации представлены существенные наработки во всех трех перечисленных направлениях. Для всех означенных задач разработаны и реализованы в виде компьютерных кодов различные алгоритмы, которые позволяют существенно автоматизировать процесс работы с фейнмановскими интегралами и начать работу с интегралами очень высокой сложности.

При разработке алгоритмов была учтена специфика развития современных компьютеров — возрастающая распространенность многоядерных компьютеров, а также доступность больших объемов дисковых пространств при практически не возрастающей тактовой частоте процессоров.

В процессе создания алгоритмов автором также даны строгие определения некоторых терминов, использовавшихся и ранее при вычислении фейнмановских интегралов, а именно, областей (в рамках метода разложения по областям) и мастер-интегралов (в рамках метода интегрирования по частям). Работа с данными объектами на математическом языке позволила, в том числе, доказать теорему о конечности числа мастер-интегралов.

Указанные алгоритмы сделаны публичными. В диссертации имеется глава, содержащая подробные инструкции по использованию пакета разработанных автором диссертации алгоритмов.

Результаты автора подтверждаются как физическими результатами, полученными им совместно с соавторами, так и результатами независимых исследователей, использовавших данные программы.

Результаты диссертации опубликованы в следующих изданиях

[1] *Lee R. N., Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Master Integrals for Four-Loop Massless Propagators up to Transcendentality Weight Twelve // Nucl. Phys. 2012. Vol. B856. P. 95–110.

[2] *Lee R. N., Smirnov A. V., Smirnov V. A.* On Epsilon Expansions of Four-loop Non-planar Massless Propagator Diagrams // Eur. Phys. J. 2011. Vol. C71. P. 1708.

[3] *Pak A., Smirnov A.* Geometric approach to asymptotic expansion of Feynman integrals // Eur. Phys. J. 2011. Vol. C71. P. 1626.

[4] *Smirnov A. V., Petukhov A. V.* The number of master integrals is finite // Lett. Math. Phys. 2011. Vol. 97. P. 37–44.

[5] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Tentyukov M.* FIESTA 2: parallelizeable multiloop numerical calculations // Comput. Phys. Commun. 2011. Vol. 182. P. 790–803.

[6] *Lee R. N., Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Analytic Results for Massless Three-Loop Form Factors // JHEP. 2010. Vol. 04. P. 020.

[7] *Lee R. N., Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Dimensional recurrence relations: an easy way to evaluate higher orders of expansion in ε // Nucl. Phys. Proc. Suppl. 2010. Vol. 205-206. P. 308–313.

[8] *Maier A., Maierhofer P., Marquard P., Smirnov A. V.* Low energy moments of heavy quark current correlators at four loops // Nucl. Phys. 2010. Vol. B824. P. 1–18.

[9] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Full result for the three-loop static quark potential // PoS. 2010. Vol. RADCOR2009. P. 075.

[10] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* The static quark potential to three loops in perturbation theory // Nucl. Phys. Proc. Suppl. 2010. Vol. 205-206. P. 320–325.

[11] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Three-loop heavy quark potential // PoS. 2010. Vol. ICHEP2010. P. 217.

[12] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Three-loop static potential // Phys. Rev. Lett. 2010. Vol. 104. P. 112002.

[13] *Smirnov A. V., Tentyukov M.* Four Loop Massless Propagators: a Numerical Evaluation of All Master Integrals // Nucl. Phys. 2010. Vol. B837. P. 40–49.

[14] *Tentyukov M., Smirnov A. V.* Applications of FIESTA // PoS. 2010. Vol. ACAT2010. P. 081.

[15] *Baikov P. A., Chetyrkin K. G., Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Quark and gluon form factors to three loops // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. P. 212002.

[16] *Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Hepp and Speer Sectors within Modern Strategies of Sector Decomposition // JHEP. 2009. Vol. 05. P. 004.

[17] *Smirnov A. V., Smirnov V. A.* On the Resolution of Singularities of Multiple Mellin- Barnes Integrals // Eur. Phys. J. 2009. Vol. C62. P. 445–449.

[18] *Smirnov A. V., Tentyukov M. N.* Feynman Integral Evaluation by a Sector decomposiTion Approach (FIESTA) // Comput. Phys. Commun. 2009. Vol. 180. P. 735–746.

[19] *Smirnov A. V.* Algorithm FIRE – Feynman Integral REduction // JHEP. 2008. Vol. 10. P. 107.

[20] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Evaluating the three-loop static quark potential // Nucl. Phys. Proc. Suppl. 2008. Vol. 183. P. 308.

[21] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Fermionic contributions to the three-loop static potential // Phys. Lett. 2008. Vol. B668. P. 293–298.

[22] *Smirnov A. V., Smirnov V. A.* On the reduction of Feynman integrals to master integrals // PoS. 2007. Vol. ACAT2007. P. 085.

[23] *Smirnov A. V., Smirnov V. A., Steinhauser M.* Applying Mellin-Barnes technique and Groebner bases to the three-loop static potential // PoS. 2007. Vol. RADCOR2007. P. 024.

[24] *Grozin A. G., Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Decoupling of heavy quarks in HQET // JHEP. 2006. Vol. 11. P. 022.

[25] *Smirnov A. V.* An algorithm to construct Groebner bases for solving integration by parts relations // JHEP. 2006. Vol. 04. P. 026.

[26] *Smirnov A. V., Smirnov V. A.* Applying Groebner bases to solve reduction problems for Feynman integrals // JHEP. 2006. Vol. 01. P. 001.

[27] *Smirnov A. V., Smirnov V. A.* S-bases as a tool to solve reduction problems for Feynman integrals // Nucl. Phys. Proc. Suppl. 2006. Vol. 160. P. 80–84.

[28] *Смирнов А. В.* Проективные орбиты редуктивных групп и многогранники Бриона // УМН. 2005. Т. 60. С. 147.

[29] *Смирнов А. В.* Многогранники весов и их приложения к теории представлений алгебраических групп. Дисс. на соиск. уч. ст. канд. физ.-мат. наук. МГУ, 2005.

Подписано в печать 04.06.2012 г. Формат 60x84/16
Бумага офс. № 1. Печать ризо.
Усл. печ. л. 2.0. Тираж 100 экз.
Заказ № 4.

Участок оперативной печати НИВЦ МГУ.
119991, ГСП-1, Москва, НИВЦ МГУ имени М.В.Ломоносова